



TITLE:

17.平面波バンド計算法の収斂性の改良の試みおよびその水素-ヘリウム系への応用(大阪大学大学院基礎工学研究科物理系専攻,修士論文題目・アブストラクト(1990年度))

AUTHOR(S):

田中, 豊

CITATION:

田中, 豊. 17.平面波バンド計算法の収斂性の改良の試みおよびその水素-ヘリウム系への応用(大阪大学大学院基礎工学研究科物理系専攻,修士論文題目・アブストラクト(1990年度)). 物性研究 1991, 57(1): 144-145

ISSUE DATE:

1991-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94718>

RIGHT:

とにガスケットのまわりに磁化測定用のコイルが組み込めるように設計し、部品はダイヤモンドとセラミックのベアリングをのぞきガスケットも銅ベリリウムで製作した。鉛の超伝導転移がWittigらによって測られており、それを追試してこの装置を検定した。室温で約5万気圧を発生し冷却しSQUIDにより磁化を測定した。大きなバックグラウンドに乗っているが、Wittigらのデータと同じ約5度に超伝導転移を示す信号が現れた。圧力を0に戻し再度冷却して常圧の転移温度(約7.2度K)に信号が現れるのを確認した。また、約8,9万気圧についてもそれぞれ同様に行い、十分な感度で測定できることを確認した。当初から予想されたがDAC部品の熱膨張率の違いにより冷却することで設定した圧力から変化するのがみられた。バックグラウンドの評価とともにこれから取り組むべき問題である。

17. 平面波バンド計算法の収斂性の改良の試みおよびその 水素-ヘリウム系への応用

田 中 豊

木星、土星等の巨大惑星の内部構造モデルは、金属化している水素にヘリウム原子が溶解しないと言う仮定に基づいていて、超高圧下での液体及び固体水素に対するヘリウム原子の溶解性の研究は、重要な意味を持っている。

しかしながら、この溶解性はまだよくわかっていない、直接実験するには、圧力領域が高過ぎる(4~40 Mbar程度)。理論的には、高圧の極限(100 Mbar以上)と低圧の極限(1 Mbar以下)の研究は成されているものの、もっとも興味ある圧力領域での信頼できる研究はまだない。

その最大の理由は、混合状態のGibbsの自由エネルギーと分離状態のGibbsの自由エネルギーの差が非常に小さいため、H系・He系・H-He系に異なる計算方法を使用すると、計算方法の違いによる内在的な計算誤差の方が大きくなる可能性があるためである。

今回の我々の計算では、この点を考慮にいて、計算誤差が構造やHe濃度に原理的に依存しない平面波バンド計算法を採用した。この平面波バンド計算法は、金属水素については一応の成功を納めた。しかしながらH-He系を扱うには、さらに膨大な数の平面波を必要とし、計算機的能力から困難である。そこで我々

は短波長の平面波の効果摂動として扱うことで、少数の平面波で、無限数の平面波を使用したのと同様の効果を得る方法を定式化した。我々はこの方法の有効性と共に、0 Kの様々なHe濃度の系に対し、マードルングエネルギーの低い複数の結晶構造について、全エネルギーを計算した。

(この研究は、方法自体は前年度の牧野氏の研究を引継いだものであるが、再定式化を行い、収斂性および計算コストを改良した。)

18. Laves 相化合物 RMn_2 ($\text{R}=\text{Tb}, \text{Gd}$) における圧力誘起強磁性

田 中 立

ラーベス相化合物 RMn_2 (R : 希土類元素) 系では、 R と Mn がともに磁気モーメントを持つ場合、複雑な磁性を示すことが知られている。これは $\text{R}-\text{R}$ 間に強磁性的な、 $\text{R}-\text{Mn}$ 間に (反) 強磁性的な、 $\text{Mn}-\text{Mn}$ 間に反強磁性的な相互作用が働き、それらが互いに競合するためであると考えられている。 TbMn_2 , GdMn_2 は、 R 、 Mn の両方がモーメントをもつため複雑なヘリカル構造磁性体であることが中性子回折によって確かめられている。これらの RMn_2 系で Mn がモーメントを持つための条件として、格子定数が重要な因子であると考えられている。すなわち DyMn_2 を境に、それよりも格子定数の大きな化合物では Mn がモーメントを持ち、小さい化合物ではモーメントを持たない。 TbMn_2 , GdMn_2 は格子定数がこの臨界値に近い大きさであるため、格子定数を縮めてやれば Mn モーメントが消失すると予想される。これまでこのようなラーベス相化合物 RMn_2 系において、格子定数と磁性との関係を調べるために、 R をより原子半径が小さく非磁性の Sc 等で置換した”化学的な圧力”を用いた実験しかなされていなかった。今回 TbMn_2 及び GdMn_2 の磁化を一定磁場下で直接静水圧を加えることにより測定したので報告する。

TbMn_2

常圧での磁化-温度曲線では、50K付近で Mn モーメント発生によるヘリカルオーダーを示す鋭いピークが確認され、50K以上では強磁性的な振る舞いを示す。この50Kでのピークは加圧によって低温側へシフトし、5.3kbarで完全に消失し、 M-T 曲線は強磁性的になった。また低温での磁化も加圧により急激に増大した。これらの結果は化学的圧力を用いた $\text{Tb}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Mn}_2$ 系と定性的に同じである。

GdMn_2

常圧では Mn モーメント発生に伴い110K付近で小さなクニックを示す。このクニックは加圧に伴い低温側へシフトしたが $\text{Gd}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Mn}_2$ 系と様相が異なり、シフトに伴い大きくはっきりとしてきた。また低温での磁化は増大した。今回の圧力範囲では Mn モーメントの消失は確認されなかったが、約15kbarで